

表 3.1: (低位)発熱量と断熱火炎温度

化合物	構造	化学式	$Q_c$ [kJ mol <sup>-1</sup> ]	$Q_c/n_{O_2}^{*1}$ [kJ mol <sup>-1</sup> ]	$T_b^{*2}$ [K]
水素		H <sub>2</sub>	242	484	2380
一酸化炭素		CO	283	566	2380
メタン		CH <sub>4</sub>	802	401	2220
ペンタン		C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	3272	409	2270
イソペンタン		C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	3265	408	2270
シクロヘキサン		C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	3689	410	2280
エチレン		C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	1323	441	2370
1-ペンテン		C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>	3155	421	2310
アセチレン		C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	1257	503	2540
エタノール		C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	1277	426	2240
DME		C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	1328	443	2280
ETBE		C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> O	3740	416	2270
ベンゼン		C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	3169	423	2340
トルエン		C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	3772	419	2330
吉草酸メチル		C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	3341	418	2250
カプリン酸メチル		C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> O <sub>2</sub>	6415	414	2260

\*1  $n_{O_2}$  = 完全燃焼に必要な酸素のモル数

\*2 空気との当量混合気の 1 atm における断熱火炎温度

表 3.2: 断熱定圧平衡  
(H<sub>2</sub>:O<sub>2</sub>=2:1, 1 atm)

温度 [K]	3075
モル分率 [%]	
H <sub>2</sub> O	58.16
H <sub>2</sub>	14.89
OH	11.25
H	7.58
O <sub>2</sub>	4.92
O	3.20

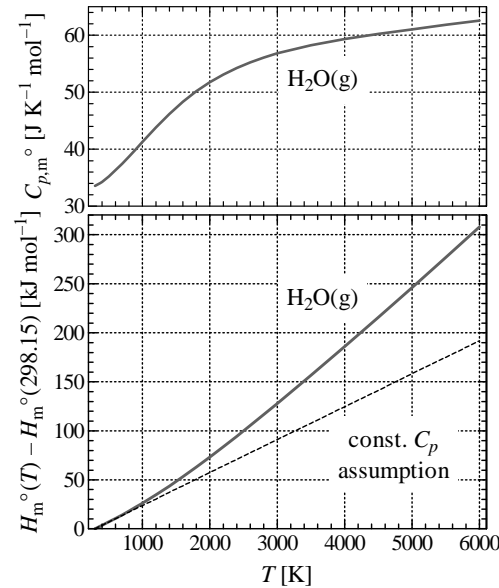


図 3.1: 水蒸気 H<sub>2</sub>O(g) のモル定圧熱容量

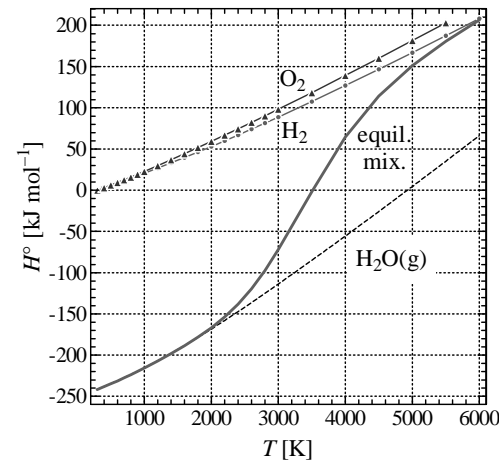


図 3.2: エンタルピーの温度変化

表 3.3: NASA CEA2 平衡計算入力例

i) H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> (束縛条件なし)

```
problem case=h2-o2 hp p(atm)=1
phi,eq.ratio=1
react
fuel= H2 wt%=100 t(k)= 298.15
oxid= O2 wt%=100 t(k)= 298.15
end
```

ii) H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> (生成物を H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> に限定)

```
problem case=h2-o2 hp p(atm)=1
phi,eq.ratio=1
react
fuel= H2 wt%=100 t(k)= 298.15
oxid= O2 wt%=100 t(k)= 298.15
only H2O H2 O2
end
```

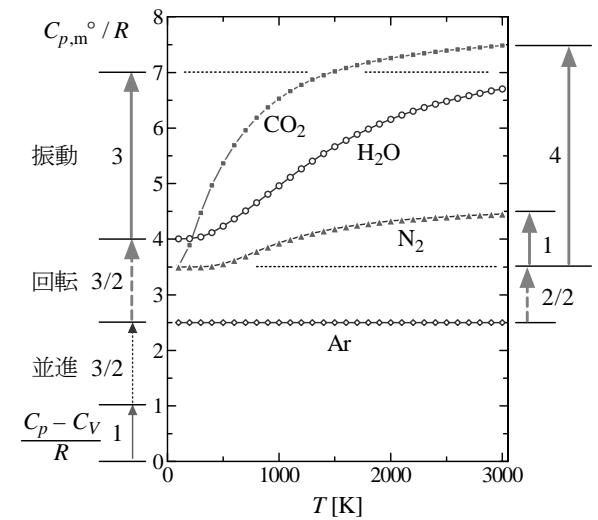


図 3.3: 定圧モル熱容量への分子運動の寄与